ランダム系のクラスター展開

阪大・教養　植　山　宏

（10月10日受理）

§ 1.

ランダム系を一般的に取扱う方法として，グリーン函数のダイアグラム展開法[1),5)]が有力視されて来た。しかし，この方法では，高次のダイアグラムを集めるのが困難な点[2)]と，簡単なダイアグラムを集めただけでは奇妙な特異性が残る点[3)]と二つの障壁がある。

ここでは，Kubo の Generalized Cumulant Expansion[4)] の方法がランダム系の研究に有力である事を示す。格子振動を問題にする場合と，電子状態を問題にする場合とがあるが，ここでは混晶の電子的な状態密度を対象とする。

モデルとしては，Yonezawa －Matsubara[5)] と同じものを用いる。従って，系のハミルトニアンは次のようになる。

$$H = H_0 + H_1 \qquad \cdots\cdots (1)$$

$$\left.\begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \sum_j W_A(r-R_j) \\ H_1 &= \sum_j \rho_j V(r-R_j) \\ V(r-R_j) &\equiv V_j \equiv W_B(r-R_j) - W_A(r-R_j) \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

ここに $\{\rho_j\}$ が系のランダムネスを特徴づける。ここでは，

$$\left.\begin{aligned} &<\rho_j{}^n> = C \qquad (n \geqq 1) \\ &<\rho_{j1} \cdots \rho_{jn}>_c = 0 \quad \text{unless} \quad j_1 = j_2 = \cdots = j_n \end{aligned}\right\} \quad (3)$$

なるものとする。

§2.

さて，系の状態密度は次のように書ける。

$$D(E) \equiv \sum_{\lambda} \delta(E - E_{\lambda})$$
$$= \frac{1}{\pi} R_e \int_0^{\infty} dt\, e^{it(E+i\varepsilon)} T_r\, e^{-itH_0} \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) \quad \cdots\cdots (4)$$

ここに $\exp_+$ は time ordered exponential であり，

$$H_1(t) \equiv e^{itH_0} H_1\, e^{-itH_0}$$

系のランダムネスによって平均された状態密度 $\langle D(E) \rangle$ を求める為には，次のモーメントが求まればよい事が分る。

$$M(t) \equiv \left\langle \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) \right\rangle \quad \cdots\cdots (5)$$

ここで，Generalized Cumulant Expansion Theorem を用いると

$$M(t) = \exp_+ \left\langle \exp_+ \left(i \int_0^t H_1(t') dt' \right) - 1 \right\rangle_c$$
$$= \exp_+ \sum_{n=1}^{\infty} i^n \int_0^t dt_1 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \langle H_1(t_1) \cdots H_1(t_n) \rangle_c$$

となる。この右辺のキュムラントは，(2) 式及び (3) の第二式を用いて書直せば，

$$\langle \cdots \rangle_c = \sum_{j1} \cdots \sum_{jn} \langle \rho_{j1} \cdots \rho_{jn} \rangle_c V_{j1}(t_1) \cdots V_{jn}(t_n)$$
$$= \sum_j \langle \rho_j^n \rangle_c V_j(t_1) \cdots V_j(t_n)$$

となるが，ここでキュムラントの表式 $P_n(c)$ を使わないで，再びモーメントの表現に戻す。

$$M(t) = \exp_+ \sum_i \left\langle \exp_+ \left(i \int_0^t \rho_j V_i(t') dt' \right) - 1 \right\rangle_c$$

$$= \Pi_+ < \exp_+ (i \int_0^t \rho_i V_i(t') dt') >$$

このモーメントを展開して，(3) の第一式を用いれば，結局

$$M(t) = \exp_{+L} \sum_j C \left\{ \exp_+ (i \int_0^t V_i(t') dt') - 1 \right\} \quad \cdots\cdots (6)$$

ここに，$\exp_L$ は leveled exponential である。(6) の素直な展開は，クラスター展開であり，この場合には同時に C の巾展開になっている。

今，グリーン函数を導入する。

$$G(E) = \frac{1}{E - H_0 - H_1} \quad \cdots\cdots (7)$$

但し，分母の $+ i\varepsilon$ は省略した。すると (6) 式の展開より，

$$< G(E) > = \sum_{n=0}^{\infty} C^n \, G(E)^{(n)} \quad \cdots\cdots (8)^{*)}$$

という形に求まる。$G(E)^{(n)}$ は n 次クラスターよりの寄与を表す。最初の数項を書いてみれば

$$G(E)^{(0)} = g$$

$$G(E)^{(1)} = \sum_j (G_j - g)$$

$$G(E)^{(2)} = \sum_{(ij)} (G_{ij} - G_i - G_j + g)$$

$$G(E)^{(3)} = \sum_{(ij\ell)} (G_{ij\ell} - G_{ij} - G_{j\ell} - G_{i\ell} + G_i + G_j + G_\ell - g)$$

$$\cdots\cdots \quad \cdots\cdots (9)$$

但し，

$$g = 1 / (E - H_0)$$

$$G_i = 1 / (E - H_0 - V_j)$$

$$G_{ij} = 1 / (E - H_0 - V_i - V_j)$$

$$\cdots\cdots \qquad (10)$$

ダイアグラム法との関連を見る為に，次のようにセルフ・エネルギーを導入する。

$$\Sigma_k = 1 / g_k - 1 / \langle G(E) \rangle_{kk} \qquad (11)$$

(8) 式を代入すると，Σ_k も亦，C の巾級数に展開出来る事が分る。

$$\Sigma_k = \sum_{n=1}^{\infty} C^n \Sigma_k^{(n)} \qquad (12)$$

但し

$$\Sigma_k^{(1)} = G_k^{(1)} / g_k^2$$

$$\Sigma_k^{(2)} = G_k^{(2)} / g_k^2 - (G_k^{(1)} / g_k)^2 / g_k$$

$$\Sigma_k^{(3)} = G_k^{(3)} / g_k^2 - 2 G_k^{(1)} G_k^{(2)} / g_k^3 - (G_k^{(1)} / g_k)^3 / g_k$$

$$\cdots\cdots \qquad (13)$$

十分に低濃度領域では (12) の最初の数項で近似する事も有効であろう。第一及び第二項は，Langer[1] によって議論されたものである。また，(8) 式で最初の何項かをとった近似は，Chô－Toyozawa[6] によって特別に簡単化したモデルについて議論されたクラスターに対応するものと考えられる。

脚注　なお，この低濃度展開については，別の観点よりSeitz－Turnbull 編 Solid State Physics の別巻 (1963) p.198に論じられている。

§ 3.

もう少し，高い濃度の所を議論する為には，非摂動系として一様に混った系をとるのが有利であろう。この時は

$$H = \widetilde{H}_0 + \widetilde{H}_1$$

$$\widetilde{H}_0 = H_0 + c \sum_j V_j \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (14)$$

$$\widetilde{H}_1 = \sum_j (\rho_i - c) V_i$$

と分解して，§ 2 と同じ操作を行えば，

$$<G(E)> = i \int_0^\infty dt\, e^{it(E-\widetilde{H}_0)} \Pi_+ \Big\{ (1-C)\exp_+\big(-ci\int_0^t V_i(t')dt'\big) + c\, \exp_+\big((1-c)\, i\int_0^t V_i(t')dt'\big) \Big\}$$

$$= i\int_0^\infty dt\, e^{it(E-\widetilde{H}_0)} \exp_{+L} \sum_i \alpha \Big\{ (1-c)\exp_+\Big[-ci\int_0^t V_i(t')dt'\Big] + c\, \exp_+\Big[(1-c)\, i\int_0^t V_i(t')dt'\Big] - 1 \Big\} \cdots (15)$$

となる。但し，第二式では便宜上パラメーターαを導入したが，これは 1 と置かねばならない。

(15) 式を展開すれば，

$$<G(E)> = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha^n \widetilde{G}(E)^{(n)} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (16)$$

という形に求まる。但し，

$$\widetilde{G}(E)^{(0)} = \widetilde{g} \equiv 1 / (E - \widetilde{H}_0)$$

$$\widetilde{G}(E)^{(1)} = \sum_j \left\{ \frac{(1-c)}{E-\widetilde{H}_0 + cV_i} + \frac{c}{E - \widetilde{H}_0 - (1-c)V_i} - g \right\}$$

$$\cdots\cdots \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots (17)$$

この場合には，展開パラメーター α は意味を持たないが，$\widetilde{G}(E)^{(n)}$ はやはり n 次のクラスターの寄与を表す。従って，大きなクラスターに因く，スペクトルの微細構造を問題にしなければ，最初の数項で近似してよいと思われる。

§ 4.

前節の結果をイオン混晶の自己主張型＝融合型の問題に応用してみる。この問題はすでに Onodera － Toyozawa[7)]（以下 OT と略記）によって取扱われて居り，また，参考文献も豊富に載せられている。

彼らは，ハミルトニアン

$$H = \sum_{n} \varepsilon_n a_n^{*} a_n + \sum_{m\cdot n} t_{mn} a_m^{*} a_n$$

より出発したが，これは我々の場合には，ポテンシャル V が大きさ $\triangle = \varepsilon_B - \varepsilon_A$ のデルタ函数である場合に対応する。$\widetilde{G}^{(1)}$ まで取った近似を，彼らの記法で書けば，

$$\begin{aligned} \langle G(E) \rangle_k &= \frac{c_A}{E-(t_k+c_A\varepsilon_A+c_B\varepsilon_B)+c_B\Delta} + \frac{c_B}{E-(t_k+c_A\varepsilon_A+c_B\varepsilon_B)-c_A\triangle} \\ &= \frac{c_A}{E-t_k-\varepsilon_A} + \frac{c_B}{E-t_k-\varepsilon_B} \qquad \cdots\cdots (18) \end{aligned}$$

となる。

（18）式は OT に比して極めて簡単であるが，彼らがセルフ・エネルギーの形を推定するのに用いた次の諸点はすべて満足している。即ち

(i)　A ⟷ B の置換について対称

(ii)　$t_k \to 0$，及び $\triangle \to 0$ で共に正確な表式になる。

(iii)　セルフ・エネルギーは低濃度では正確な式となる。

更に比較の為，セルフ・エネルギーの形で展開式を書いてみると，

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_k(E) &= g_k^{-1} - \langle G_k(E) \rangle^{-1} \\ &= c_B c_A \triangle^2 g_k - c_B c_A (c_B - c_A) \triangle^3 g_k^2 + c_B c_A (1 - 4 c_B c_A) \triangle^4 g_k^3 \\ &\quad + O(\triangle^5) \end{aligned}$$

これを OT の (2—12) 式と比較すると，$\triangle^3$ の項まで一致しており，2次のクラスターの効果が出て来ると云われる $\triangle^4$ の項からわずかに違ってくる。

さて，(18) 式より状態密度を求めると，

$$D(E) = c_A \rho(E-\varepsilon_A) + c_B \rho(E-\varepsilon_B) \quad \cdots\cdots (19)$$

となる。但し，$\rho(E)$ は純粋な系の状態密度である。今，$\rho(E)$ がバンド巾Tを持つとすれば，混晶は $\triangle/T > 1$ の時に自己主張型になり，$\triangle/T < 1$ の時に融合型になるという簡単な結果になる。

もう少し進んだ結果については別の機会に議論したい。

討論及び激励をされた西山，松原両先生及び福島氏に感謝します。

文　　献

1) S.F.Edwards, Phil. Mag. 3 ('58) 1020
J.S.Langer, J.Math. Phys. 2 ('61) 584
2) S.F.Edwards. Proc. Phys. Soc. 85 ('65) 1
3) P.L.Leath and B.Goodman, Phys. Rev. 148 ('66) 968
4) R.Kubo J.Phys, Soc. Japan 17 ('62) 1100
5) F.Yonezawa and T.Matsubara Prog. Then. Phys. 35 ('66) 357
6) K.Chô and Y.Toyozawa 統計力学国際会議講演 ('68)
7) Y.Onodera and Y.Toyozawa J.Phys. Soc. Japau 24 ('68) 341